

01;05;11

Энергобаланс в системе игла–образец туннельного микроскопа в режиме модификации поверхности

© И.А. Дорофеев

Институт физики микроструктур РАН,
603600 Нижний Новгород, Россия

(Поступило в Редакцию 4 апреля 1996 г.)

Проведен анализ вклада различных механизмов энерговыделения в игле сканирующего туннельного микроскопа в режиме, характерном для локальной модификации поверхности твердого тела с учетом специфики геометрии микроскопа. Показано, что доминирующий механизм нагрева зависит от параметров материала и режима протекания тока. Из решения точной задачи получена формула для оценки температуры острия модельной формы в виде параболоида вращения. На основе известных решений задач флуктуационной электродинамики получено выражение для скорости диссипации энергии теплового электромагнитного поля полупространства в острие иглы туннельного микроскопа.

Введение

Широкие возможности сканирующих туннельных микроскопов (СТМ) в исследовании и локальной модификации поверхности твердых тел привлекают все большее внимание. Существует много работ, посвященных СТМ и использованию этих приборов для нанометровой модификации вещества, появились обзорные работы [1-3]. Предложены разнообразные механизмы взаимодействия иглы СТМ с образцом, приводящие к локальному изменению каких-либо свойств материала или его рельефа. Элементарные оценки интересующих величин получены на основе феноменологического рассмотрения физических процессов с использованием аналитических зависимостей, справедливых в одномерной геометрии. Несмотря на множество возможных причин модификации вещества под иглой СТМ, можно выделить круг физических процессов, анализ которых должен быть обязательно проведен при работе практически с любым материалом. В частности, это — процессы, приводящие к нагреву и деформации вещества при протекании тока между электродами микроскопа. Так, в работах [4,5] с использованием одномерных решений показано, что эффект Ноттингама дает основной вклад в нагрев иглы и образца из золота при протекании тока 10^{-5} А. В нашей работе [6] на основе решения трехмерной задачи проведена оценка температуры материала с параметрами, характерными для объемного металла, подтверждающая вывод о том, что нагрев материала только за счет джоулевого выделения тепла незначителен вплоть до тока порядка 10^{-4} А. Необходимо отметить, что свойства приповерхностных слоев существенно отличаются от объемных и при больших токах и температурах, близких к температуре инверсии эффекта Ноттингама, эффект Джоуля становится доминирующим даже для металлов. Динамика нагрева иглы достаточно подробно исследовалась в задачах, связанных с автоэлектронной микроскопией. Основные результаты теоретических и экспериментальных работ и соответствующие ссылки

приведены в [7–10]. В этих работах для модельных форм эмиссионного острия численно решалось уравнение теплопроводности с различными граничными условиями. Основная цель исследований связывалась с определением пороговых значений плотности тока и приложенного поля, соответствующих необратимым изменениям формы эмиттера. Несмотря на достаточно полный учет факторов, определяющих нагрев острия, необходимо подчеркнуть, что в нашей задаче имеется ряд особенностей, принципиально отличающих ее от автоэмиссионной. В частности, это — предельная близость двух электродов СТМ, следствием чего может быть взаимовлияние иглы и образца на динамику нагрева, сложность определения электрического поля в туннельном промежутке, размер которого сравним с пространственным масштабом атомных полей, возможность работы СТМ на воздухе и в других химически активных средах и необходимость учета протекающих реакций на поверхности материалов и т.д. Поэтому задачу определения механизма модификации поверхности образца необходимо решать с учетом возможного влияния острия СТМ.

В нашей работе проведен анализ основных процессов энерговыделения в игле туннельного микроскопа, показано, что доминирующий процесс зависит от материала острия и режима протекания тока. Для модельной формы иглы в виде параболоида вращения получена формула для оценки температуры острия за счет джоулевого нагрева из решения точной задачи. На основе известных решений задач флуктуационной электродинамики получено выражение для мощности диссипации энергии теплового электромагнитного поля полупространства в острие иглы СТМ.

Постановка задачи

Будем считать, что игла — это часть пространства, ограниченная двумя параболоидами вращения. Параболы, определяющие эту фигуру, являются координатными линиями параболической системы координат [11].

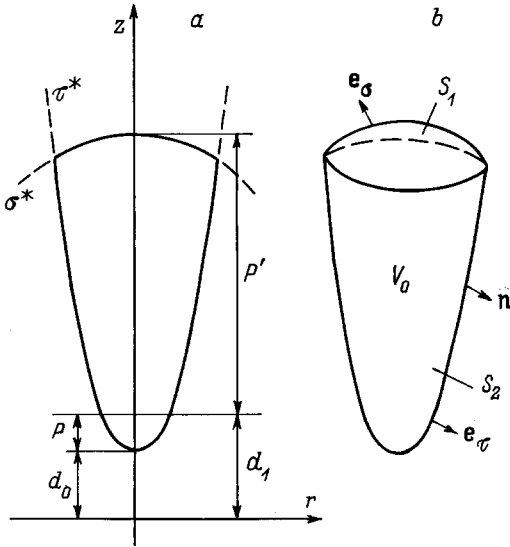


Рис. 1.

Рис. 1, *a, b* иллюстрирует связь выбранной системы координат с декартовой и геометрию задачи: поверхность иглы образуется параболой σ^* и τ^* , p и p' — фокальные параметры, d_0 — расстояние между острием иглы и образцом, $l = p + p'$ — длина иглы, \mathbf{e}_σ и \mathbf{e}_τ — единичные орты параболической системы координат, \mathbf{n} — нормаль к поверхности иглы, S_1 и S_2 — поверхности вращения, ограничивающие объем иглы V_0 . Ниже приводятся формулы, связывающие декартовы и параболические координаты в нашем случае, и коэффициенты Ламе h_i :

$$\begin{aligned} x &= \sigma\tau \cos \psi, & h_\sigma &= (\sigma^2 + \tau^2)^{1/2}, \\ y &= \sigma\tau \sin \psi, & h_\tau &= (\sigma^2 + \tau^2)^{1/2}, \\ z &= 1/2(\sigma^2 - \tau^2) + d_1, & h_\psi &= \sigma\tau, \end{aligned}$$

где ψ — полярный угол.

Как видно из построения, выбор σ^* и τ^* однозначно определяется фокальными параметрами $p = 1/2(\sigma^*)^2$ и $p' = 1/2(\tau^*)^2$, задающими также длину иглы l .

Будем также считать, что приложенное напряжение U вызывает протекание тока между электродами СТМ в соответствии с законом Фаулера–Нордгейма, поэтому, как и в [6], на поверхности иглы S_2 задается граничное условие, моделирующее туннельный контакт в следующем виде:

$$\mathcal{J}(\sigma, \tau^*) = \mathcal{J}_0 \exp(-a\sigma^2 - b), \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_0 &= e^3 E^2 / 16\pi^2 \hbar \mu t^2(y), \\ a &= 2(2m)^{1/2} \mu^{3/2} \Theta(y) / 3\hbar e U \\ &= 6.85 \cdot 10^7 \mu^{3/2} \Theta(3.62 \cdot 10^{-4} E^{1/2} / \mu), \\ b &= 4(2m)^{1/2} \mu^{3/2} \Theta(y) d_0 / 3\hbar e U, \end{aligned}$$

где e , m , μ — заряд, масса и работа выхода электрона; $E \simeq U/d$, $d = 1/2\sigma^2 + d_0$; $t(y)$ и $\Theta(y)$ — функции Нордгейма [12,13].

В нашем случае для $E = 10^7 - 10^8$ V/cm, $U = 10$ V, $\mu = 1 - 5$ eV имеем $t(y) \simeq 1$, $\Theta(y) = 0.1 - 0.4$. Поэтому в расчетах далее принималось $a = 10^6 - 10^7$ cm $^{-1}$.

Как показывает численный счет с использованием результатов [6], стационарное значение температуры на поверхности образца под иглой СТМ за счет выделения джоулевого тепла достигается за время порядка 10^{-8} s. Причиной этого является малый эффективный размер области энерговыделения. Поэтому рассмотрим задачу нахождения стационарного распределения температуры в игле выбранной формы под действием различных источников тепла, действующих как в объеме, так и на поверхности острия. Для этого, как известно [14], необходимо решить следующую задачу:

$$\Delta T(M) + f(M)/\varkappa = 0, \quad M(\sigma, \tau, \psi) \in V_0, \quad (2)$$

$$T|_{S_1} = T(\sigma^*, \tau, \psi) = 0,$$

$$\varkappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{S_2} = \varkappa \frac{\partial T}{\partial n}(\sigma, \tau^*, \psi) = f_s(\sigma, \tau^*, \psi),$$

где \varkappa — коэффициент теплопроводности, f и f_s — объемный и поверхностный источники тепла.

Общее решение, выраженное через функцию Грина этой задачи, хорошо известно

$$\begin{aligned} T(M) &= \iint_{S_2} \left[G(M, P) \frac{\partial T(P)}{\partial n} \right]_{P \in S_2} dS_P \\ &+ \iiint_{V_0} \frac{1}{\varkappa} f(P) G(M, P) dV_P, \end{aligned} \quad (3)$$

где интегрирование производится по области действия источников тепла.

В нашей работе подразумевается правомерность использования феноменологического подхода, поскольку рассматриваются острия с фокальным параметром, значительно превышающем длину свободного пробега электронов. По этой же причине эффект Ноттингама считается поверхностным и учитывается только в граничном условии задачи. Далее в работе будет оценена мощность энерговыделения за счет эффектов Джоуля, Томсона, Ноттингама [13,15], а также за счет диссипации в острие микроскопа энергии флуктуационного электромагнитного поля, порождаемого нагретым образцом [16]. Как отмечалось в [17], если два тела расположены на большом расстоянии друг от друга, то перенос энергии между ними будет осуществляться радиационной частью теплового электромагнитного поля. Интенсивность энергообмена в этом случае описывается законом Стефана–Больцмана. При достаточно малых расстояниях между телами, когда энергия теплового флуктуационного поля сосредоточена в основном в квазистационарной (эванесцентной) части этого поля, перенос энергии будет

подчиняться совершенно иным закономерностям. Таким образом, одна из целей этой работы заключается в оценке вкладов перечисленных механизмов диссипации энергии в игле туннельного микроскопа. Для этого найдем функцию Грина задачи (2) для выбранной области (рис. 1, а).

Решение

Искомая функция Грина должна удовлетворять однородным граничным условиям и уравнению (2) с δ -образным источником

$$\Delta G(M, P) = -\delta(M - P),$$

$$G(M, P)|_{S_1} = 0, \quad \frac{\partial G(M, P)}{\partial n}|_{S_2} = 0, \quad (4)$$

где $M(\sigma, \tau)$ и $P(\xi, \eta)$ — точки наблюдения и источника соответственно.

В параболической системе координат с учетом осевой симметрии задачи имеем

$$\frac{1}{\sigma^2 + \tau^2} \left(\frac{1}{\sigma} \frac{\partial}{\partial \sigma} \sigma \frac{\partial G}{\partial \sigma} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \tau \frac{\partial G}{\partial \tau} \right) = -\frac{\delta(\sigma - \xi)\delta(\tau - \eta)}{2\pi\sigma\tau(\sigma^2 + \tau^2)},$$

$$G(\sigma, \tau; \xi, \eta)|_{\sigma=\sigma^*} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \tau}|_{\tau=\tau^*} = 0. \quad (5)$$

Решение будем искать в виде ряда

$$G(\sigma, \tau; \xi, \eta) = \sum_{n=1}^{\infty} F_n(\sigma; \xi, \eta) J_0(\mu_n \tau / \tau^*), \quad (6)$$

где J_0 — функция Бесселя; $F_n(\sigma; \xi, \eta)$ — функция, подлежащая определению; μ_n — корни уравнения $J_1(\mu) = 0$ для удовлетворения второму граничному условию на поверхности $\tau = \tau^*$.

Подставим (6) в (5), умножим обе части равенства на $\tau J_0(\mu_m \tau / \tau^*)$ и проинтегрируем от 0 до τ^* . Учитывая условие нормировки

$$\int_0^{\tau^*} \tau J_0(\mu_m \tau / \tau^*) J_0(\mu_n \tau / \tau^*) d\tau = \begin{cases} (\tau^*)^2 J_0(\mu_n) / 2, & \mu_m = \mu_n, \\ 0, & \mu_m \neq \mu_n, \end{cases}$$

для определения функции $F_n(\sigma, \xi, \eta)$ получаем неоднородное уравнение Бесселя

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d}{d\sigma} \sigma \frac{dF_n}{d\sigma} - \left(\frac{\mu_n}{\tau^*} \right)^2 F_n = -\frac{J_0(\mu_n \eta / \tau^*)}{\pi(\tau^*)^2 J_0^2(\mu_n)} \frac{\delta(\delta - \xi)}{\sigma}. \quad (7)$$

Два линейно независимых решения однородной части этого уравнения выберем в виде, удовлетворяющем первому граничному условию задачи (5)

$$Y_1 = I_0(\mu_n \sigma / \tau^*),$$

$$Y_2 = K_0(\mu_n \sigma / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*),$$

где I_0 и K_0 — модифицированные функции Бесселя.

Решение неоднородного уравнения (7) можно получить, зная два линейно независимых решения соответствующего однородного уравнения и их определитель Вронского [18],

$$F_n(\sigma; \xi, \eta) = \frac{J_0(\mu_n \eta / \tau^*)}{\pi(\tau^*)^2 J_0^2(\mu_n)} \times \begin{cases} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \xi / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \right], & \sigma < \xi, \\ I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \sigma / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \right], & \sigma > \xi. \end{cases}$$

В результате получаем искомое выражение для функции Грина задачи (5). Полученное решение удовлетворяет граничным условиям и уравнению Лапласа везде в V_0 , за исключением точки (ξ, η) , в которой имеет особенность

$$G(\sigma, \tau; \xi, \eta) = \frac{1}{\pi(\tau^*)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\mu_n \tau / \tau^*) J_0(\mu_n \eta / \tau^*)}{J_0^2(\mu_n)} \times \begin{cases} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \xi / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \right], & 0 \leq \sigma < \xi \leq \sigma^*, \\ I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \sigma / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \right], & 0 \leq \xi < \sigma \leq \sigma^*. \end{cases} \quad (8)$$

Далее для сравнительной оценки рассмотрим различные выражения для источников тепла.

1. Д ж о у л е в о т е п л о. Для точного решения задачи необходимо найти пространственное распределение плотности тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\lambda \text{grad} \varphi(\mathbf{r})$, где λ — удельная электропроводность материала иглы, φ — потенциал. С этой целью надо решить уравнение Лапласа для потенциала с заданными на границах S_1 и S_2 нормальными компонентами плотности тока

$$\Delta \varphi(\sigma, \tau) = 0, \quad (\sigma, \tau) \in V_0 \quad (9)$$

$$-\lambda \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{S_1} = \mathcal{I}_0 / S_1, \quad -\lambda \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{S_2} = \mathcal{J}_0 \exp(-a\sigma^2 - b).$$

Из условия существования решения для уравнения Лапласа, заключающегося в равенстве тока, протекающего через площадки S_1 и S_2 , следует необходимая связь \mathcal{I}_0 и \mathcal{J}_0 . Решение для потенциала выражается через функцию Грина этой задачи

$$\varphi(M) = \iint_{S_1} G(M, P) \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{S_1} dS_1 + \iint_{S_2} G(M, P) \frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{S_2} dS_2. \quad (10)$$

Решение второй краевой задачи определено с точностью до константы, но для наших целей необходимы только пространственные производные, что и снимает вопрос о неоднозначном решении этой задачи. Функция Грина задачи (9) находится аналогичным путем и имеет вид

$$G(\sigma, \tau; \xi, \eta) = \frac{1}{\pi(\tau^*)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\mu_n \tau / \tau^*) J_0(\mu_n \eta / \tau^*)}{J_0^2(\mu_n)}$$

$$\times \begin{cases} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \xi / \tau^*) - \frac{K_1(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_1(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \right], & 0 \leq \sigma < \xi \leq \sigma^*, \\ I_0(\mu_n \xi / \tau^*) \left[K_0(\mu_n \sigma / \tau^*) - \frac{K_1(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_1(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_0(\mu_n \sigma / \tau^*) \right], & 0 \leq \xi < \sigma \leq \sigma^*. \end{cases}$$

Найденная функция Грина решает в принципе поставленную задачу. Следует заметить, что задача (9) включает неоднородные граничные условия, поэтому в решении (10) формальное удовлетворение граничным условиям невозможно и их надо понимать как предельное значение всей бесконечной суммы при стремлении координат к границе выбранной области [14]. Для простейшей оценки выражение для плотности тока в игле запишем с учетом того, что, согласно второму граничному условию задачи (9), часть тока при распространении вдоль иглы теряется через поверхность S_2 из-за эмиссии

$$\mathcal{J}(\sigma, \tau) = \frac{\mathcal{I} - \mathcal{I}(\sigma, \tau)}{S(\sigma, \tau)}, \quad (10a)$$

где $S(\sigma, \tau) = \pi r^2 = \pi \sigma^2 (\tau^*)^2$ — площадь поперечного сечения иглы,

$$\mathcal{I}_0 = \int_0^{2\pi} \int_{\sigma^*}^0 \mathcal{J}_0 \exp(-a\sigma^2 - b) \sigma \tau^* [\sigma^2 + (\tau^*)^2]^{1/2} d\sigma d\psi,$$

$$\mathcal{I} = \int_0^{2\pi} \int_{\sigma^*}^{\sigma} \mathcal{J}_0 \exp(-a\sigma^2 - b) \sigma \tau^* [\sigma^2 + (\tau^*)^2]^{1/2} d\sigma d\psi.$$

Интегрирование и подстановка в (10a) дает

$$\mathcal{J}(\sigma, \tau) = \frac{\mathcal{I}_0}{\pi \sigma^2 (\tau^*)^2} \times \left\{ 1 - \frac{\gamma[3/2, a((\sigma^*)^2) + (\tau^*)^2] - \gamma[3/2, a(\sigma^2 + (\tau^*)^2)]}{\gamma[3/2, a((\sigma^*)^2) + (\tau^*)^2] - \gamma[3/2, a(\tau^*)^2]} \right\}, \quad (11)$$

где γ — неполная гамма-функция.

Поскольку $a \simeq 10^6 - 10^7 \text{ см}^{-1}$, $\tau^* = (2p)^{1/2} \simeq 10^{-2} - 4.5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{1/2}$ для фокального параметра $p = 10^{-4} - 10^{-5} \text{ см}$, $\sigma^* = (2p')^{1/2} \simeq 1 \text{ см}^{1/2}$, то имеем очевидные неравенства $a(\sigma^*)^2 \gg 1$, $a(\tau^*)^2 \gg 1$ и $a(\sigma^*)^2 \gg a(\tau^*)^2$. Замечая, что $\gamma(\alpha + 1) = \alpha \gamma(\alpha, x) = x^\alpha e^{-x}$ и $\gamma(1/2, x^2) = \pi^{1/2} \Phi(x)$, где Φ — функция ошибок [19], получим для области вблизи острия, т.е. в пределе $(\sigma/\tau^*)^2 \ll 1$ и $a\sigma^2 \ll 1$, простое выражение для плотности тока из формулы (11) $\mathcal{J} = \mathcal{I}_0 a / \pi (\tau^*)^2$ и плотности мощности джоулевого тепла

$$f_J = \frac{\mathcal{I}_0^2 a^2}{\lambda \pi^2 (\tau^*)^4}. \quad (12)$$

Подставляя (8) и (12) в (3) и интегрируя по координатам источника тепла по η от нуля до τ^* и по ξ от нуля до некоторого значения $\sigma = u$, такого чтобы выполнялись условия справедливости (12), получим выражение для температуры вершины острия иглы, т.е. температуры в точке $\tau = \tau^*$, $\sigma = 0$,

$$T(0, \tau^*) = \frac{4\mathcal{I}_0^2 a^2}{\lambda \pi^2} \left(\frac{u}{\tau^*} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^3} \left[\frac{\tau^*}{\mu_n u} - K_1(\mu_n u / \tau^*) - \frac{K_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)}{I_0(\mu_n \sigma^* / \tau^*)} I_1(\mu_n u / \tau^*) \right].$$

Ряд в этой формуле хорошо сходится и для параметра $u/\tau^* = 0.1 - 0.5$ имеет практически постоянное значение $(7-8) \cdot 10^{-3}$, если суммирование производить по десяти первым корням уравнения $J_1(\mu_n) = 0$. Последующее суммирование еще трехсот членов ряда дает ошибку, не превышающую 1%. Как видно из полученной формулы, температура острия растет с уменьшением фокального параметра. Для сравнения оценим мощность джоулевых потерь в острие иглы

$$W_J = \int_0^{2\pi} \int_0^{\tau^*} \int_0^u \frac{\mathcal{J}^2}{\lambda} \sigma \tau (\sigma^2 + \tau^2) d\sigma d\tau d\psi \simeq \frac{\mathcal{J}_0^2 a^2 p}{32\pi\lambda}$$

$$\simeq \begin{cases} 4.5 \cdot 10^{-8} \text{ W} & \text{для } \lambda = 2 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}, \\ 9 \cdot 10^{-6} \text{ W} & \text{для } \lambda = 10^{14} \text{ с}^{-1}. \end{cases}$$

Оценка проведена для $a = 10^7 \text{ см}^{-1}$, $\mathcal{I}_0 = 3 \cdot 10^4 \text{ CGH}$, $p = 10^{-5} \text{ см}$ и значении параметра $u/\tau^* = 0.25$. При оценке мощности других потерь будут использоваться эти же значения.

2. **Т е п л о Т о м с о н а.** Эффект Томсона возникает при наличии градиента температуры в материале, при этом плотность мощности выделяющегося тепла равна

$$f_r = -\frac{\pi\mathcal{K}^2T}{2e\mathcal{E}_F}(\mathcal{J}\text{grad}T),$$

где \mathcal{K} — постоянная Больцмана, \mathcal{E}_F — энергия Ферми.

Выделяемую мощность за счет этого эффекта оценим так:

$$W_T = \int_0^{2\pi} \int_0^{\tau^*} \int_0^u f_r \sigma \tau (\sigma^2 + \tau^2) d\sigma d\tau d\psi \\ \simeq \frac{\pi\mathcal{K}^2T\Delta T a p}{32e\mathcal{E}_F} \mathcal{I}_0 \simeq 1-7 \cdot 10^{-9} \text{ W}$$

для $T = 300-1300 \text{ K}$, $\text{grad}T \simeq \Delta T/p$, $\Delta T \simeq 100 \text{ K}$, $\mathcal{E}_F = 9 \text{ eV}$.

3. **Т е п л о Н о т т и н г а м а.** Эффект Ноттингама связан с эмиссией электронов, при этом, если средняя энергия электронов, поступающих из внешней цепи, больше средней энергии, уносимой электронами эмиссии, то выделение избыточной энергии $\Delta\mathcal{E}$ приведет к нагреву решетки, в противном случае материал эмиттера будет охлаждаться. Инверсия эффекта происходит при некоторой температуре T_i [7]. Поверхностная плотность мощности выделяемого тепла $f_{SN} = -\mathcal{J}\Delta\mathcal{E}/e$, где $\mathcal{J} = \mathcal{J}_{FN}(\pi T/2T_i)/\sin(\pi T/2T_i)$, $\Delta\mathcal{E} = -\pi\mathcal{K}T \text{ctg}(\pi T/2T_i)$, \mathcal{J}_{FM} — плотность автоэмиссионного тока при $T = 0$. Мощность, выделяемую на поверхности эмиттера, оценим следующим образом:

$$W_N = \int_0^{2\pi} \int_0^u f_{SN} \sigma \tau^* [\sigma^2 + (\tau^*)^2]^{1/2} d\sigma d\psi \\ \simeq \frac{\pi^2\mathcal{K}T^2 \text{ctg}(\pi T/2T_i)\mathcal{I}_0}{2eT_i \sin(\pi T/2T_i)} \\ \simeq \begin{cases} 2.2 \cdot 10^{-6} - 1.4 \cdot 10^{-7} \text{ W} & \text{для } T_i = 1322 \text{ K}, \\ 1.1 \cdot 10^{-6} - 2 \cdot 10^{-4} \text{ W} & \text{для } T_i = 700 \text{ K}. \end{cases}$$

Оценка проведена для $T = 300-1300 \text{ K}$ и двух значений температуры инверсии: экспериментальной для вольфрама T_i' , согласно данным [5], и теоретической по формуле $T_i = 2e\hbar E/3\pi(2m\Phi)^{1/2}\mathcal{K}$ для $E = 5 \cdot 10^7 \text{ V/cm}$, $\Phi = 4.6 \text{ eV}$.

В том случае если эмиттером является образец, в игле будет выделяться энергия, равная разности средней энергии электронов, преодолевших барьер, и средней энергии электронов в игле, к которой приложено положительное смещение eU . При низких температурах будет справедлива оценка сверху $f_S < \mathcal{J}U$, что по порядку величины сравнимо с эффектом Ноттингама.

4. **Т е п л о д ж о у л е в ы х п о т е р ь ф л у к т у а ц и о н н о г о э л е к т р о м а г н и т н о г о п о л я.** Феноменологическая теория [20] рассматривает флуктуационное электромагнитное поле как поле,

создаваемое распределенными в материале случайными сторонними источниками, причиной существования которых являются различного рода флуктуации: квантовые, тепловые и т.д. Применение теоремы взаимности и флуктуационно-диссипационной теоремы позволяет вычислять на основе вывода соответствующих корреляционных функций разнообразные энергетические характеристики случайных полей. В нашем случае, определяя тепловые шумы, наведенные в острие иглы нагретым образцом, необходимо найти джоулевы потери в острие. С этой целью воспользуемся решением задачи о тепловом излучении тонких металлических проводников, поперечные размеры которых много меньше длины волны. В этом приближении флуктуационный ток I , наводимый тепловым полем окружающих тел в тонком проводнике, выражается следующим образом:

$$|\overline{I^2}| = \frac{2}{\pi|\mathcal{E}_0|^2} \int \Theta dQ_0, \quad (13)$$

где $\mathcal{E}_0 = Z\mathcal{I}_0$ — сосредоточенная интегральная эдс, Z — полный импеданс острия, $\Theta(T) = \hbar\omega/2 + \hbar\omega/(\exp(\hbar\omega/\mathcal{K}T) - 1)$ — средняя энергия осциллятора при температуре T , dQ_0 — джоулевы потери электромагнитного поля осциллятора в элементе объема образца.

Зная (13), искомую нами мощность тепловых потерь в острие найдем по формуле

$$W_{eV} = 2 \int_0^\infty \text{Re}Z|\overline{I^2}| d\omega. \quad (14)$$

Будем считать, что в фокальной точке острия (рис. 1, а) помещен осциллятор на расстоянии $h = d_0 + p$ от поверхности полупространства. Электрический дипольный момент осциллятора равен $\mathcal{L} = (\mathcal{I}_0 p/i\omega)\mathbf{e}$, где i — мнимая единица, \mathbf{e} — единичный вектор. Мощность потерь электромагнитного поля осциллятора в полупространстве, заполненном изотропной проводящей средой с комплексной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_1 = \varepsilon_1' - i\varepsilon_1''$, определена в [16] и для произвольно ориентированного электрического диполя равна

$$Q_0 = \frac{\omega^2}{4c} \int_0^\infty \exp(-(q+q^*)h) \rho d\rho \left[i(|\mathcal{L}_x|^2 + |\mathcal{L}_y|^2) \right. \\ \left. \times (|q|^2 S_\varepsilon/k^2 + S_\mu) + 2|\mathcal{L}_z|^2 \rho^2 S_\varepsilon/k^2 \right], \quad (15)$$

где $S_\varepsilon = k(q_1^*/\varepsilon_1^* - q_1\varepsilon_1)/|q + q_1/\varepsilon_1|^2$, S_μ получается заменой ε_1 на μ_1 , c — скорость света, $q = (\rho^2 - k^2)^{1/2}$, $q_1 = (\rho^2 - k_1^2)^{1/2}$.

Рассмотрим случай, когда диполь ориентирован вдоль оси Oz . Случай произвольной ориентации рассматривается аналогично. На малых расстояниях, когда $kh \ll 1$, волновой частью поля можно пренебречь и учитывать только квазистационарное поле, которому соответствуют значения $\rho > k$. Поэтому интегрируя в (15), получим с точностью до членов порядка

$(kh)^{-2}$, что $Q_0 = I_0^2 p^2 \varepsilon_1'' / 2\omega h^3 |1 + \varepsilon_1|^2$. Полный импеданс острия размером порядка p запишем в виде $Z = (1 - i)(\omega/2\pi\lambda c^2)^{1/2}$ [21]. Полагая $\varepsilon_1 = 1 - i4\pi\lambda/\omega$ и подставляя (13) и выражение для Q_0 в (14), имеем окончательно

$$W_{ev} = \frac{\hbar\lambda c p^2}{8(2\pi^3)^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{[\exp(\alpha x) - 1](1 + x^2/4\pi^2)}, \quad (16)$$

где $x = \omega/\lambda$, $\alpha = \hbar\lambda/KT$.

Таким образом, получается обратная кубическая зависимость мощности джоулевых потерь от h . Очевидно, что чем меньше p , тем точнее оценка W_{ev} . Следует отметить, что W_{ev} есть по смыслу разность между мощностью, генерируемой в острие флуктуационным полем образца нагретого до температуры T_1 , и мощностью, выделяемой в образце при диссипации в нем флуктуационного поля острия, нагретого до температуры T_2 . Именно поэтому в (16) не входит энергия нулевых колебаний, создаваемых всем пространством, поскольку любой поток энергии этих колебаний в любом направлении полностью гасится встречным.

В работе [17] получено решение подобной задачи в одномерном случае, когда два полупространства разделены некоторым промежутком d_0 в наших обозначениях. Передаваемая эванесцентными волнами мощность на единицу поверхности от одного полупространства с температурой T_1 другому с температурой T_2 выражается в виде

$$W'_{ev} = \frac{\hbar\lambda^2}{\pi^2 d_0^2} \int_0^\infty \frac{[\exp(\alpha_2 x) - \exp(\alpha_1 x)] x dx}{[\exp(\alpha_1 x) - 1][\exp(\alpha_2 x) - 1]} \times \int_0^\infty \frac{y \exp(-y) dy}{1 + x^2/\pi^2 + 16\pi^2(1 - \exp(-y))^2/x^2 - 8(1 - \exp(-y))}. \quad (17)$$

Из полученного результата авторов [17] видно, что в одномерном случае диссипируемая мощность обратно пропорциональна квадрату расстояния между плоскими поверхностями. Считая, что эффективная принимающая площадь острия порядка πp^2 получаем $W_{ev} = W'_{ev} \pi p^2$.

Численный счет проводился для случая $T_2 = 0$, $\Delta T = T_1 - T_2 = T$, что согласуется со смыслом рассматриваемого механизма обмена энергией. Результат расчета по формулам (16) и (17) для случая $d_0 = 10^{-7}$ см и электропроводности материалов иглы и образца $\lambda = 2 \cdot 10^{16}$ с $^{-1}$, соответствующей вольфраму, представлен на рис. 2. Кривая 1 этого рисунка рассчитана по формуле (16), кривая 2 — по формуле (17). Штриховая кривая и штрихпунктир рассчитаны по формуле (16) с электропроводностью золота ($\lambda = 3.5 \cdot 10^{17}$ с $^{-1}$) и графита ($\lambda = 10^{14}$ с $^{-1}$) соответственно. Расчет по обеим формулам показывает, что передаваемая мощность на несколько порядков больше той мощности, которая соответствует закону Стефана–Больцмана.

Выводы

Как показывает проведенный анализ, выделяемая мощность в острие иглы СТМ определяется параметрами материала иглы, ее геометрией и протекающим между электродами микроскопа током.

В случае чистых металлов на начальных этапах разогрева иглы может доминировать механизм выделения тепла, основанный на эффекте Ноттинггама. С ростом тока и температуры материала увеличивается вклад джоулевых потерь, а роль эффекта Ноттинггама становится стабилизирующей. При небольшой разности температур между иглой и образцом (до 10^2 К) джоулева диссипация энергии флуктуационного поля незначительна для хороших металлов на фоне вклада эффекта Ноттинггама. Роль эффекта Томсона, по-видимому, сводится к установлению распределения температуры по материалу.

Совершенно иная ситуация может наблюдаться, если материал электродов характеризуется электропроводностью, много меньшей, чем у хороших металлов (графит, углеродные пленки, аморфные металлы). В этом случае основной источник тепла — это джоулевы потери, поскольку в рамках имеющихся теоретических результатов характер тепловыделения при действии эффекта Ноттинггама зависит лишь от величины тока в первой степени и работы выхода материала. Наряду с этим, как видно из рис. 2, с уменьшением электропроводности значительно возрастает скорость диссипации энергии теплового флуктуационного поля даже для небольшой разницы температур (10^1 К) между электродами. Здесь заметим, что формулы для скорости диссипации энергии флуктуационного поля получены в рамках представлений о δ -коррелированных случайных источниках в среде. По-видимому, учет конечного радиуса корреляции приведет к иной зависимости от расстояния между электродами, во всяком случае на расстояниях, сравнимых с радиусом корреляции.

В целом можно сказать, что в динамике нагрева иглы и образца в СТМ существенную роль должны играть стабилизирующие факторы за счет эффекта Ноттинггама

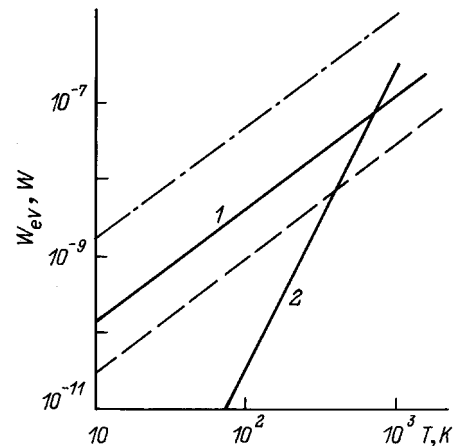


Рис. 2.

и джоулевой диссипации энергии теплового флуктуационного поля.

Касаясь вопроса о механизмах модификации свойств поверхности образца под иглой микроскопа, отметим два обстоятельства, встречающихся, как правило, в экспериментах. Первое связано с тем, что подача импульса напряжения на туннельный промежуток производится при разорванной петле обратной связи СТМ. В этих условиях разогрев и деформация иглы и образца могут привести к механическому контакту между ними и, как следствие, к изменению граничных условий в математической постановке задачи и вида источников тепла. Поэтому реальная картина процесса модификации чрезвычайно сложная. Второй факт, отмечающийся в подавляющем большинстве экспериментальных работ, — независимость факта локальной модификации от полярности приложенного напряжения к туннельному промежутку, что свидетельствует о независимости процессов, вызывающих изменение свойств поверхности, от направления протекания тока. Это, на наш взгляд, может являться подтверждением как большой роли джоулевой диссипации энергии из-за того, что свойства приповерхностных слоев вещества значительно отличаются от свойств объемных, так и примерно одинакового энерговклада в оба электрода при туннелировании электронов через барьер с последующей термализацией носителей заряда в игле и образце.

Заключение

Таким образом, в нашей работе проведен анализ основных процессов энергоснабжения в игле туннельного микроскопа, показано, что доминирующий процесс зависит от материала острия и режима протекания тока. Для модельной формы иглы в виде параболоида вращения получена формула для оценки температуры острия за счет джоулевого нагрева из решения точной задачи. На основе известных решений задач флуктуационной электродинамики получено выражение для скорости диссипации энергии теплового электромагнитного поля полупространства в острие иглы СТМ, имеющее обратную кубическую зависимость от расстояния между электродами.

В данной работе и в работе [6] получены решения для точного численного расчета температуры поверхности образца в СТМ геометрии, необходимого для анализа возможных механизмов локальной модификации поверхности твердых тел.

Автор признателен А.А. Андронову, В.Н. Курину и Н.Н. Салащенко за ценные замечания по результатам работы.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 95-02-03595.

Список литературы

- [1] Эдельман В.С. // ПТЭ. 1991. № 1. С. 24–42.
- [2] Владимиров В.В., Грязев А.А. // Вестник СПбУ. 1993. № 4. С. 24–40.
- [3] Scanning Tunneling Microscopy I, II, III / Ed. H.J. Guntherodt, R. Wiesendanger. Berlin; Heidelberg, 1992.
- [4] Xu B., Lager K., Moller R et al. // Appl. Phys. A. 1994. Vol. 59. P. 155–161.
- [5] Gratzke U., Simon G. // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. N 11. P. 8535–8540.
- [6] Дорофеев И.А. // ЖТФ. 1995. Т. 10. Вып.1. С. 99–110.
- [7] Levine P.H. // J. Appl. Phys. 1962. Vol. 33. N 2. P. 582–587.
- [8] Dyke W.P., Trolan J.K. // Phys. Rev. 1953. Vol. 89.
- [9] Литвинов Е.А., Месяц Г.А., Проскуровский Д.И. // УФН. 1983. Т. 139. № 2. С.265–302.
- [10] Глазнов Д.В., Баскин Л.М., Фурсей Г.Н. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 5. С. 60–68.
- [11] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1968. 720 с.
- [12] Gadzuk J.W., Plummer E.W. // Rev. of Mod. Phys. 1973. Vol. 45. N 3. P. 487–548.
- [13] Елинсон Н.И., Васильев Г.Ф. Автоэлектронная эмиссия. М.: Физматгиз, 1958. 272 с.
- [14] Карташов Э.М. Аналитические методы в теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа. 1979. 480 с.
- [15] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 623 с.
- [16] Левин М.Л., Рытов С.М. Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике. М.: Наука, 1967. 308 с.
- [17] Loomis J.J., Maris M.J. // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50. N 24. P. 18517–18524.
- [18] Морс Ф.М., Феибах Г. Методы теоретической физики. Т. 1. М.: ИЛ, 1958. 930 с.
- [19] Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963. 1100 с.
- [20] Рытов С.М. Теория электрических флуктуаций и теплового излучения. М.: Изд-во АН СССР, 1953.
- [21] Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. М.: Сов. радио, 1957. 581 с.